第27卷 第2期 工 程 数 学 学 报 Vol. 27 No. 2
2010年04月 CHINESE JOURNAL OF ENGINEERING MATHEMATICS Apr. 2010

文章编号:1005-3085(2010)02-0194-13

均匀剪切流场中液晶聚合物微观结构的无网格模拟*

王晓东， 欧阳洁， 苏 进

(西北工业大学应用数学系，西安 710129)

摘 要: 采用基于Doi理论的微-宏观双尺度模型研究了液晶聚合物在均匀剪切流场中的微观结构。为保证模拟结果的可靠性，在模型求解中率先使用了高精度、高稳定性的无网格方法，并通过对均匀流场中均质液晶聚合物系统的数值模拟，验证了该方法的有效性。文中着重研究了De数对平板Couette流中液晶聚合物微观结构的影响。模拟得到了液晶聚合物分子四种典型的微观运动结构，即弹性稳态、周期翻转、周期摆动和随流取向。定量分析了De数对两种周期运动的影响，预测了各种结构下分子的有序程度和可能出现的缺陷，并通过对取向角的详细分析，发现了两种边界层效应。

关键词: 剪切流；液晶；微观结构；双尺度；无网格

分类号: **AMS**(2000) 76A15 **中图分类号**: O373; O753+.2 **文献标识码**: A

1 引言

液晶是有别于液体和晶体的一种独立物质形态，它可以像液体一样流动，同时又具有分子取向的某种有序性。正是由于这种有序性的存在，使得液晶具有高强度、高模量、低热涨系数和良好的光电特性等优点。液晶的加工过程多包含剪切流动和拉伸流动。研究液晶分子在流场中的运动规律，对从宏观尺度控制和保持液晶分子的高度有序排列具有重要的现实意义。

根据生产条件的不同，液晶被分为热致液晶和溶致液晶。通过加热形成液晶相的称为热致液晶，通过加入溶剂形成液晶相的称为溶致液晶。目前的研究主要集中在溶致液晶。近几十年来，不少学者已在这方面做出了一些突出的贡献。首先对刚性长棒状高分子液晶溶液做出理论解释的是美国物理学家Onsager[1]和美国高分子学家Flory[2]。在小分子液晶方面，有著名的Maier-Saupe平均场理论[3]。在数值模拟方面，学者使用Doi模型[4] (适用于稳态流场) 成功模拟出液晶聚合物溶液众多复杂的分子动力学现象。

平板Couette流是最简单也是最常见的剪切流动，整个流场拥有唯一的剪切率，属于均匀剪切流动。但是宏观上的均匀，并不能简单地推演到微观。由于微观边界效应的存在(边界会阻碍分子的转动)，液晶聚合物的微观结构在整个流场中并不均匀。边界效应破坏了分子取向的有序性，从而会形成缺陷。

本文采用基于Doi理论的微-宏观双尺度模型来研究平板Couette流中液晶聚合物浓溶液的微观结构。模拟中需要直接求解描述分子取向扩散的Smoluchowski方程[4]，求解的精度和稳定性对模拟结果具有重要影响。因而模拟过程对数值方法的精度和稳定性具有较高要求。无网格方法[5,6]是近年来出现的一种新型数值方法，无单元Galerkin (Element Free Galerkin, EFG) 方法[7]是无网格方法的一种。该方法在构造近似函数时，只需要节点

收稿日期: 2009-11-23. **作者简介**: 王晓东 (1986年5月生)，男，硕士. 研究方向：无网格方法及复杂流体数值模拟.
***基金项目**: 国家重点基础研究发展计划 (973) 项目 (2005CB321704)；国家自然科学基金 (10871159; 10590353).

的位置信息，并且计算精度高、稳定性好。为了保证模拟结果的可靠性，本文在直接求解Smoluchowski方程和宏观流场时均采用EFG方法。

文中通过研究 De 数对模拟结果的影响，得到了平板Couette流中液晶聚合物的四种典型微观结构。并分析了 De 数与周期运动的关系，研究了分子有序程度的变化，预测了可能出现的液晶缺陷，指出了边界层效应的存在。

2 液晶流体模拟的双尺度模型

液晶聚合物溶液可视为流动过程满足Navier-Stokes方程的连续介质。为了能够全面揭示液晶分子在流场中的微观结构，本文的数学模型在大分子尺度上考虑了流场对液晶分子取向扩散运动的影响，同时在宏观尺度上考虑了液晶分子在流动过程中对流场产生的应力。

2.1 液晶分子取向扩散方程

假设液晶分子具有棒状结构，设棒的长度 l 远大于直径 b，ν 为棒状分子的数目密度。采用概率密度函数 $f(\mathbf{x},\mathbf{u},t)$ 来表示 t 时刻质心位于 $\mathbf{x}$ 的硬棒指向平行于方向 $\mathbf{u}$ 的可能性，这里 $\mathbf{u}$ 为单位向量。当同时考虑转动扩散和平动扩散时，$f(\mathbf{x},\mathbf{u},t)$ 将满足如下的Smoluchowski方程

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial t}+\nabla\cdot(\mathbf{v}f) &= \frac{1}{k_BT}\nabla\cdot\left\{[D_{\parallel}\mathbf{uu}+D_{\perp}(\mathbf{I}-\mathbf{uu})]\cdot(\nabla f+f\nabla U)\right\}\\ &\quad+\frac{D_r}{k_BT}\mathcal{R}\cdot(\mathcal{R}f+f\mathcal{R}U)-\mathcal{R}\cdot(\mathbf{u}\times\kappa\cdot\mathbf{u}f),\end{aligned}\tag{1}$$

这里 k_B 为Boltzmann常数，T 为热力学温度，$\mathbf{v}$ 为宏观流场速度，$\kappa=(\nabla\mathbf{v})^{\mathrm{T}}$ 为速度梯度张量，$\mathcal{R}=\mathbf{u}\times\partial/\partial\mathbf{u}$ 为转动算子，D_r 为旋转扩散系数，$D_{\parallel}$ 和 $D_{\perp}$ 分别为平行和垂直于取向方向的平动扩散系数，并且近似满足 $D_{\parallel}=2D_{\perp}$，U 为排斥体积势，常取为Maier-Saupe势[8]

$$U=U_0k_BT\int_{|\mathbf{u}'|=1}\left|\mathbf{u}\times\mathbf{u}'\right|^2 f(\mathbf{u}')\mathrm{d}\mathbf{u}',\tag{2}$$

U_0 是与 νbl^2 成正比的无量纲参数，用以反映聚合物溶液的浓度。$U_0=0$ 表示稀溶液，$U_0>0$ 表示浓溶液。液晶聚合物应力可以通过下式计算

$$\tau^p_{\alpha\beta}=3\nu k_BTS_{\alpha\beta}-\nu\left\langle(\mathbf{u}\times\mathcal{R}U)_\alpha u_\beta\right\rangle+\frac{\nu}{2}\xi_r\kappa_{kl}\langle u_\alpha u_\beta u_k u_l\rangle,\tag{3}$$

其中 α, β, k, $l=1,2,3$，$\langle\cdot\rangle$ 表示对于分子指向的系综平均，ξ_r 为分子旋转摩擦系数，$S_{\alpha\beta}=\langle u_\alpha u_\beta-\delta_{\alpha\beta}/3\rangle$，$\delta_{\alpha\beta}$ 为Kronecker符号。

2.2 宏观流场控制方程

假设液晶聚合物溶液具有不可压缩的性质，则流场控制方程为[9]

$$\nabla\cdot\mathbf{v}=0,\tag{4}$$

$$\mathbf{v}_t+(\mathbf{v}\cdot\nabla)\mathbf{v}=-\nabla p+\eta_{\mathrm{s}}\Delta\mathbf{v}+\nabla\cdot\tau^p+\mathbf{F}^e,\tag{5}$$

$\mathbf{v}$ 为流场速度，p 为运动学压力，η_s 为溶剂的动力学粘度，τ^p 为液晶聚合物产生的粘弹性应力，$\mathbf{F}^e$ 为由于分子长程作用而产生的体力。

2.3 微-宏观双尺度模型的无量纲化

设 L_0 为流动区域特征长度，V_0 为流动特征速度，$T_0 = L_0/V_0$ 为流动时间，此时可将微-宏观耦合方程无量纲化为

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \tag{6}$$

$$\mathbf{v}_t + (\mathbf{v} \cdot \nabla)\mathbf{v} = -\nabla p + \frac{1-\gamma}{Re}\Delta \mathbf{v} + \frac{\gamma}{ReDe}(\nabla \cdot \tau^p + \mathbf{F}^e), \tag{7}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v} f) &= \frac{\varepsilon^2}{De}\nabla \cdot \big\{[D'_\perp(\mathbf{I} - \mathbf{uu})] \cdot (\nabla f + f \nabla U)\big\} \\ &\quad + \frac{1}{De}\mathcal{R} \cdot (\mathcal{R} f + f \mathcal{R} U) - \mathcal{R} \cdot (\mathbf{u} \times \kappa \cdot \mathbf{u} f),\end{aligned} \tag{8}$$

$$U = U_0 \int_{|\mathbf{u}'|=1} |\mathbf{u} \times \mathbf{u}'|^2 f(\mathbf{u}')\mathrm{d}\mathbf{u}', \tag{9}$$

$$\tau^p_{\alpha\beta} = 3S_{\alpha\beta} - \big\langle (\mathbf{u} \times \mathcal{R} U)_\alpha u_\beta \big\rangle + \frac{De}{2}\kappa_{kl}\langle u_\alpha u_\beta u_k u_l \rangle, \tag{10}$$

$$\mathbf{F}^e = -\langle \nabla U \rangle, \tag{11}$$

其中

$$De = \frac{V_0/L_0}{D_r}, \quad \varepsilon = \frac{l}{L_0}, \quad Re = \frac{V_0 L_0}{\eta_s + \nu\xi_r}, \quad \gamma = \frac{\nu\xi_r}{\eta_s + \nu\xi_r}, \quad D'_\perp = \frac{\ln(l/b)}{12(\ln(l/b) - 0.8)}.$$

3 无网格方法及其有效性验证

本文运用EFG方法求解液晶流体模拟的双尺度模型。该方法采用移动最小二乘 (Moving Least Squares, MLS) 逼近[7] 近似函数，不需要对区域进行网格剖分。

3.1 移动最小二乘逼近

在区域 Ω 中，未知标量函数 $u(\mathbf{x})$ 的移动最小二乘逼近可以表示为

$$u^h(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{m} p_j(\mathbf{x}) a_j(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{x})\mathbf{a}(\mathbf{x}), \tag{12}$$

其中 h 为节点间的平均距离，$\mathbf{p}^T(\mathbf{x})$ 为基函数向量，m 为基函数个数。为了确定 $\mathbf{a}(\mathbf{x})$，定义上述逼近误差的加权 L_2 范数为

$$R(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N} w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)\big[\mathbf{p}^T(\mathbf{x}_i)\mathbf{a}(\mathbf{x}) - u_i\big]^2, \tag{13}$$

式中 N 为节点总数，$u_i = u(\mathbf{x}_i)$ 为函数在节点 $\mathbf{x}_i$ 处的函数值，$w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$ 为节点权函数。为保证 $u^h(\mathbf{x})$ 为最佳近似，需使 $R(\mathbf{x})$ 达到最小，即满足

$$\frac{\partial R}{\partial \mathbf{a}} = \mathbf{A}(\mathbf{x})\mathbf{a}(\mathbf{x}) - \mathbf{B}(\mathbf{x})\mathbf{U} = \mathbf{0}, \tag{14}$$

这里

$$\mathbf{U} = (u_1, u_2, \cdots, u_N)^T, \quad \mathbf{A}(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^{N} w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)\mathbf{p}(\mathbf{x}_i)\mathbf{p}^T(\mathbf{x}_i),$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{x}) = \big(w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1)\mathbf{p}(\mathbf{x}_1), w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2)\mathbf{p}(\mathbf{x}_2), \cdots, w(\mathbf{x} - \mathbf{x}_N)\mathbf{p}(\mathbf{x}_N)\big),$$

从 (14) 式中求得 $\mathbf{a}(\mathbf{x})$ 并代入 (12) 式中，得到函数 $u(\mathbf{x})$ 的 MLS 逼近为

$$u^h(\mathbf{x}) = \mathbf{p}^T(\mathbf{x})\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{x})\mathbf{B}(\mathbf{x})\mathbf{U} = \mathbf{\Phi}^T(\mathbf{x})\mathbf{U}, \tag{15}$$

其中 $\mathbf{\Phi}^T(\mathbf{x}) = [\varphi_1(x), \varphi_2(x), \cdots, \varphi_N(x)]$。

3.2 有效性验证

Smoluchowski 方程的求解精度对液晶聚合物的模拟结果具有重要影响。当使用有限差分法 (Finite Difference Method, FDM) 计算时，误差累计将会破坏概率密度函数的守恒性(归一性) 或者出现负的取向概率密度值，即

$$\int_0^{2\pi} f(\theta,t)\mathrm{d}\theta \neq 1, \quad 或 \quad \exists\, f(\theta,t) < 0, \tag{16}$$

为了说明 EFG 方法可以很好地避免上述问题，下面给出均匀流场中均质系统的模拟结果。

3.2.1 均匀流场中均质系统模拟的数学模型

对于均质系统，取向概率密度函数与空间位置无关，因而在 Smoluchowski 方程中只需考虑转动扩散。此时 (8) 式简化为

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla\cdot(\mathbf{v}f) = \frac{1}{De}\mathcal{R}\cdot(\mathcal{R}f + f\mathcal{R}U) - \mathcal{R}\cdot(\mathbf{u}\times\kappa\cdot\mathbf{u}f), \tag{17}$$

f 与空间位置无关，且流体不可压，因而 $\nabla\cdot(\mathbf{v}f) = \mathbf{v}\cdot\nabla f + f\nabla\cdot\mathbf{v} \equiv 0$，(8) 式进一步简化为

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{1}{De}\mathcal{R}\cdot(\mathcal{R}f + f\mathcal{R}U) - \mathcal{R}\cdot(\mathbf{u}\times\kappa\cdot\mathbf{u}f), \tag{18}$$

所以对均匀流场中均质系统的数值模拟，只需要在流场一点处求解方程(18)。当分子的转动限定在平面内，并且考虑 Maier-Saupe 势时，方程 (18) 具体为

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial t} \;=\; & \frac{1}{De}\partial_\theta\Big(f_\theta + fU_0\int_0^{2\pi}\sin 2(\theta-\theta')f(\theta',t)\mathrm{d}\theta'\Big)\\ & -\partial_\theta\big[(\kappa_{21}\cos^2\theta + \kappa_{22}\cos\theta\sin\theta - \kappa_{11}\cos\theta\sin\theta - \kappa_{12}\sin^2\theta)f\big].\end{aligned} \tag{19}$$

3.2.2 EFG 离散格式

当时间方向采用 Crank-Nicolson 格式离散时，在第 $n+1\,(n = 0,1,2,3,\cdots)$ 个时间步，方程 (19) 的 EFG 离散格式为

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\Delta t}\Big(\varphi_i, \sum_{j=1}^N \varphi_j f_j^{n+1}\Big) + \frac{1}{2De}\Big(\partial_\theta\varphi_i, \sum_{j=1}^N \partial_\theta\varphi_j f_j^{n+1}\\ &\quad + U_0\int_0^{2\pi}\sin 2(\theta-\theta')f(\theta',t^n)\mathrm{d}\theta'\sum_{j=1}^N\varphi_j f_j^{n+1}\Big)\\ &\quad - \frac{1}{2}\Big(\partial_\theta\varphi_i, \big[\kappa_{21}\cos^2\theta + (\kappa_{22}-\kappa_{11})\cos\theta\sin\theta - \kappa_{12}\sin^2\theta\big]\sum_{j=1}^N\varphi_j f_j^{n+1}\Big)\\ &= \frac{1}{2}\Big\{-\frac{1}{De}\Big(\partial_\theta\varphi_i, f_\theta^n + f^nU_0\int_0^{2\pi}\sin 2(\theta-\theta')f(\theta',t^n)\mathrm{d}\theta'\Big)\\ &\quad + \big(\partial_\theta\varphi_i, [\kappa_{21}\cos^2\theta + (\kappa_{22}-\kappa_{11})\cos\theta\sin\theta - \kappa_{12}\sin^2\theta]f^n\big)\Big\},\end{aligned} \tag{20}$$

其中 $i=1,2,\cdots,N$。求解时，给定周期边界条件，并采用Lagrange乘子法来施加边界条件。

3.2.3 方法检验

当

$$U_0=0,\quad \kappa=\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

时，方程(19)有精确解

$$f^{\text{exact}}(\theta)=\frac{1}{C}\exp\Big(\frac{3De}{2}\cos^2\theta\Big), \tag{21}$$

常数 C 可以通过取向概率密度函数的守恒性来确定。当 $De=1$ 时，$C=15.238824$。定义 L_1 范数误差、L_2 范数误差和失恒率 η 分别为

$$\|f^{\text{exact}}-f^h\|_{L_1}=\int_0^{2\pi}\big|f^{\text{exact}}(\theta)-f^h(\theta)\big|\mathrm{d}\theta,$$

$$\|f^{\text{exact}}-f^h\|_{L_2}=\Big(\int_0^{2\pi}\big|f^{\text{exact}}(\theta)-f^h(\theta)\big|^2\mathrm{d}\theta\Big)^{1/2},$$

$$\eta=\Big|\int_0^{2\pi}f^h(\theta)\mathrm{d}\theta-1\Big|\Big/\int_0^{2\pi}f^{\text{exact}}(\theta)\mathrm{d}\theta=\Big|\int_0^{2\pi}f^h(\theta)\mathrm{d}\theta-1\Big|,$$

其中 f^h 为数值解。$De=1$ 时，分别采用EFG方法和Crank-Nicolson格式的FDM对模型进行求解。计算结果的比较如表1和表2所示。从表1和表2可以看出，与FDM相比，EFG方法具有较高的计算精度，可以很好地保证取向概率密度函数的守恒性，从而说明了EFG方法的有效性。

表1: 计算精度比较

节点数	L_1-误差		L_2-误差	
	EFG	FDM	EFG	FDM
41	0.00128258	0.046248	7.72885e-4	0.020735
81	2.87404e-4	0.024331	1.63601e-4	0.010851
121	1.23524e-4	0.016521	6.81895e-5	0.007360
161	6.83915e-5	0.012508	3.70626e-5	0.005569
201	4.33777e-5	0.010064	2.32182e-5	0.004481

表2: 失恒率比较

点数 / 方法	41	81	121	161
EFG	2.611e-16	1.295e-15	1.173e-15	3.237e-15
FDM	0.01859	0.00995	0.00678	0.00514

4 平板 Couette 流中双尺度模型的无网格离散

4.1 平板 Couette 流动

对于平板 Couette 流动，x 轴的任意垂直截面上流动情况相同，即速度和压力不随 x 的变化而变化。此时方程 (6)-(11) 具体为

$$u_t = \frac{1-\gamma}{Re}u_{yy} + \frac{\gamma}{ReDe}\partial_y \tau_{12}^p, \tag{22}$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\varepsilon^2}{De}\partial_y\big[D'_\perp(1+\sin^2\theta)(f_y + fU_y)\big] + \frac{1}{De}\partial_\theta(f_\theta + fU_\theta) + \partial_\theta(fu_y\sin^2\theta), \tag{23}$$

$$U(y,\theta) = U_0\int_0^{2\pi}\sin^2(\theta-\theta')f(y,\theta',t)\mathrm{d}\theta', \tag{24}$$

$$\tau_{12}^p = \langle\sin 2\theta\rangle - \langle U_\theta\sin^2\theta\rangle + \frac{De}{2}u_y\langle\sin^2\theta\cos^2\theta\rangle, \tag{25}$$

其中 θ 为 $\mathbf{u}$ 和 x 轴之间的夹角。计算时，先通过方程 (22) 求解流场，再通过 (23) 到 (25) 求解应力，不断重复，直到终止条件满足。

实际中，区域边界对分子的转动具有很大影响，使分子以一定的方向“锚定”在边界上，因而 U 应该包含边界效应[9]。当分子的锚定方向与x轴正向的夹角为 φ 时，边界处取值修正为

$$U(y,\theta) = U_0\int_0^{2\pi}\sin^2(\theta-\theta')f(y,\theta',t)\mathrm{d}\theta' + U_0\sin^2(\theta-\varphi), \quad y=0,1, \tag{26}$$

为了研究流场下液晶分子的取向运动情况，引入有序参量 $s\,(0\le s\le 1)$ 和取向角 $\phi\,(-\pi/2\le\phi\le\pi/2)$，即[9]

$$s=\sqrt{a^2+b^2}, \quad \phi = \arcsin\big(b/\sqrt{2s^2+2as}\big),$$

其中 $a=\langle\cos 2\theta\rangle/\langle 1\rangle$，$b=\langle\sin 2\theta\rangle/\langle 1\rangle$，$s$ 用来描述分子的有序程度，$s=0$ 对应完全无序，$s=1$ 对应所有分子一致取向；ϕ 表示取向方向与流动方向的夹角。

4.2 EFG 离散格式

由于分子的取向概率密度函数既是取向空间上的函数又是物理空间上的函数，所以直接求解 (23) 式给出的 Smoluchowski 方程相对困难。为了降低求解难度，本文采用 Lozomski[10] 提出的时间分离技术求解 Smoluchowski 方程。该方法在第 $n+1\,(n=0,1,2,3,\cdots)$ 个时间步，将 (23) 式分解为如下两个方程

$$\frac{\tilde f - f^n}{\Delta t} = \frac{1}{De}\partial_\theta(f_\theta + fU_\theta) + \partial_\theta(fu_y\sin^2\theta), \quad \theta\in[0,2\pi], \tag{27}$$

$$\frac{f^{n+1}-\tilde f}{\Delta t} = \frac{\varepsilon^2}{De}\partial_y\big[D'_\perp(1+\sin^2\theta)(f_y+fU_y)\big], \quad y\in[0,1], \tag{28}$$

计算时，先在物理空间点上求解方程 (27)，然后再在取向空间点上求解方程 (28)。

记物理空间上的 MLS 形函数为 $\varphi_i(y)\,(i=1,2,\cdots,N_1)$，取向空间上的形函数为 $\psi_j(\theta)\,(j=1,2,\cdots,N_2)$。其中 N_1，N_2 分别为物理空间和取向空间的离散点数。定义 $(\cdot,\cdot)_y$ 和 $(\cdot,\cdot)_\theta$ 分别为物理空间和取向空间上的函数内积，即

$$(u,v)_y = \int_0^1 u(y)v(y)\mathrm{d}y, \quad (g,h)_\theta = \int_0^{2\pi} g(\theta)h(\theta)\mathrm{d}\theta,$$

当时间方向采用Crank-Nicolson格式离散时，双尺度模型的EFG全离散格式如下

$$
\begin{aligned}
&(\psi_i,\tilde{f})_\theta+\frac{\Delta t}{2De}(\partial_\theta\psi_i,\tilde{f}_\theta+\tilde{f}U_\theta)_\theta+\frac{\Delta t}{2}(\partial_\theta\psi_i,\tilde{f}u_y\sin^2\theta)_\theta\\
=\ &(\psi_i,f^n)_\theta-\frac{\Delta t}{2De}(\partial_\theta\psi_i,f^n_\theta+f^nU_\theta)_\theta-\frac{\Delta t}{2}(\partial_\theta\psi_i,f^nu_y\sin^2\theta)_\theta,\quad i=1,2,\cdots,N_2,
\end{aligned}\tag{29}
$$

$$
\begin{aligned}
&(\varphi_j,f^{n+1})_y+\frac{\Delta t\varepsilon^2}{2De}\big(\partial_y\varphi_j,D'_\perp(1+\sin^2\theta)(f^{n+1}_y+f^{n+1}U_y)\big)_y\\
=\ &(\varphi_j,\tilde{f}')_y-\frac{\Delta t\varepsilon^2}{2De}\big(\partial_y\varphi_j,D'_\perp(1+\sin^2\theta)(\tilde{f}'_y+\tilde{f}'U_y)\big)_y,\quad j=1,2,\cdots,N_1,
\end{aligned}\tag{30}
$$

$$
\begin{aligned}
&(\varphi_k,u^{n+1})_y+\Delta t\frac{1-\gamma}{Re}(\partial_y\varphi_k,u^{n+1}_y)_y\\
=\ &(\varphi_k,u^n)_y-\Delta t\frac{1-\gamma}{Re}(\partial_y\varphi_k,u^n_y)_y-\Delta t\frac{\gamma}{ReDe}(\partial_y\varphi_k,\tau^p_{12})_y,\quad k=1,2,\cdots,N_1,
\end{aligned}\tag{31}
$$

其中函数

$$
\tilde{f}=\tilde{f}(y_j,\theta),\quad f^n=f(y_j,\theta,t^n),\quad \tilde{f}'=\tilde{f}(y,\theta_i),
$$

$$
f^{n+1}=f(y,\theta_i,t^{n+1}),\quad u^{n+1}=u(y,t^{n+1}),\quad u^n=u(y,t^n)
$$

及其对应的导数$\tilde{f}_\theta$，f^n_θ，$\tilde{f}'_y$，f^{n+1}_y，u^{n+1}_y，u^n_y均由3.1节中给出的MLS逼近来获得。分子的取向概率密度函数关于取向角具有周期性，因而求解方程(27)时需要给定周期边界条件。另外，为了保证取向概率密度函数的守恒性，在求解方程(28)时采用如下的守恒边界条件[9]

$$
f_y+fU_y=0.
$$

5 模拟结果

模拟过程中取锚定方向为x轴方向，即$\varphi=0$；平动扩散系数$D'_\perp=0.1$；分子相对长度$\varepsilon=0.02$；排斥体积势强度系数$U_0=10$；上板驱动速度为1，粘度比$\gamma=0.1$；Reynolds数$Re=1$。De数是描述聚合物分子松弛时间与宏观特征时间之比的无量纲参数，在2.3节中将其定义为分子旋转扩散时间与宏观特征时间的比。下面分析De数对均匀剪切流场中液晶聚合物微观结构的影响。

5.1 四种典型微观结构

5.1.1 弹性稳态(Elastic-stability)结构

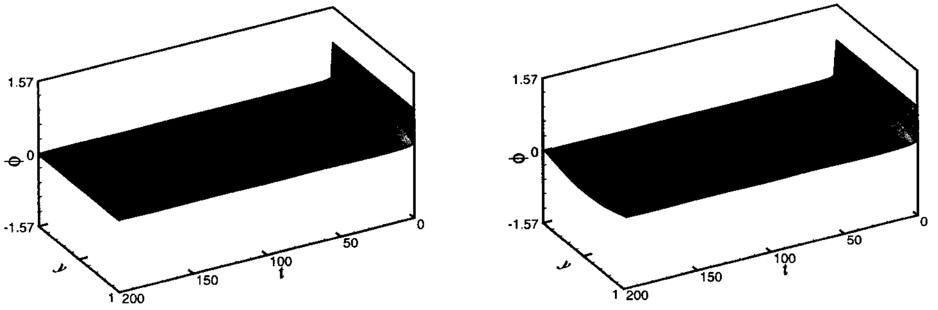
当De数充分小时，液晶聚合物在长程的弹性作用下保持稳态，称为弹性稳态结构，见图1。这种结构下，分子为了平衡流场所引致的粘性矩，取向与流场方向存在一个很小的负向偏角。对比图1(a)和图1(b)的结果可以发现，随着De数的增大，该偏角也随之增大。

5.1.2 周期翻转(Tumbling)结构

当De数逐渐增大时，分子之间的排斥体积作用逐渐增强，在非零转动矩的作用下，液晶聚合物分子开始出现周期性的翻转运动。图2(a)是弹性稳态向周期翻转的过渡，此时已经可以观察到周期性翻转运动，但流场内部各点处分子的翻转并不完全一致。随着De数进一步增大，流场内部各点处分子的翻转趋于一致，液晶聚合物出现稳定的周期翻转结构，见图2(b)。

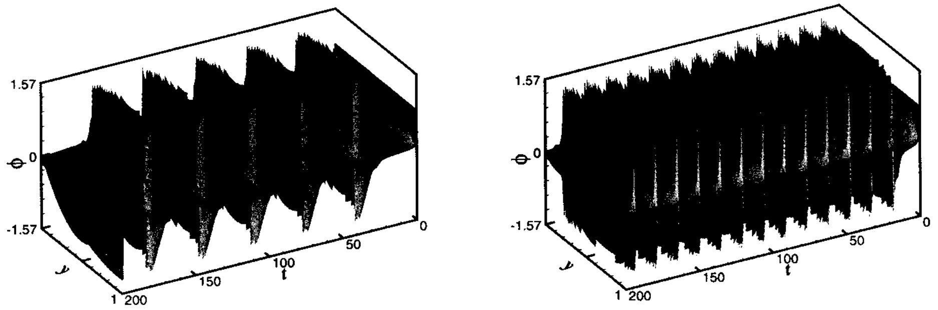
5.1.3 周期摆动(Wagging)结构

随着 De 数继续增大，分子的转动开始受到分子间排斥体积作用的抑制，运动形式由周期翻转向周期摆动转变，见图3。在这种结构里，分子绕流场方向不断摆动。并且随着 De 数的增大，分子转动的难度逐渐增大。



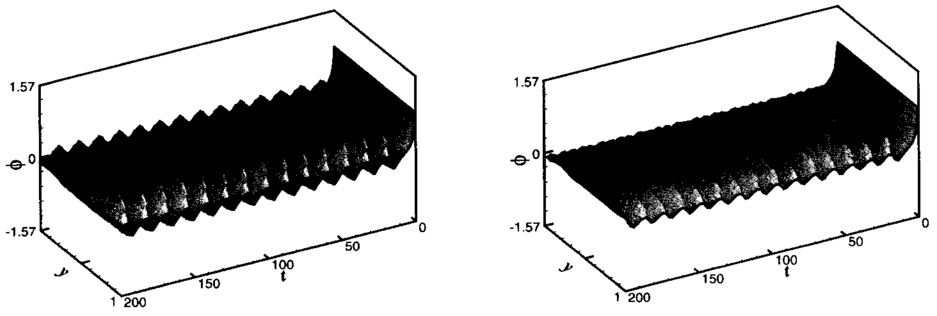
(a) $De = 0.01$ (b) De=0.1

图 1: 弹性稳态结构的取向角演化图



(a) $De = 0.2$ (b) $De = 2.0$

图 2: 周期翻转结构的取向角演化图

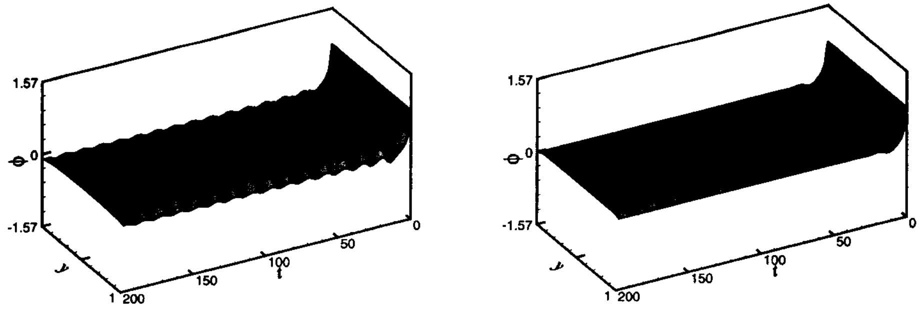


(a) $De = 15$ (b) $De = 18$

图 3: 周期摆动结构的取向角演化图

5.1.4 随流取向 (Flow-aligining) 结构

当 De 数足够大时，分子的转动完全被抑制，整个流场再次呈现稳态结构，所有分子一致沿流场取向，称为随流取向结构。图 4(a) 给出了周期摆动向随流取向转变的过渡状态，此时分子依然在周期摆动，但是摆动幅度随着时间的推进不断衰减。图 4(b) 给出的则是分子运动完全进入随流取向结构的状态。

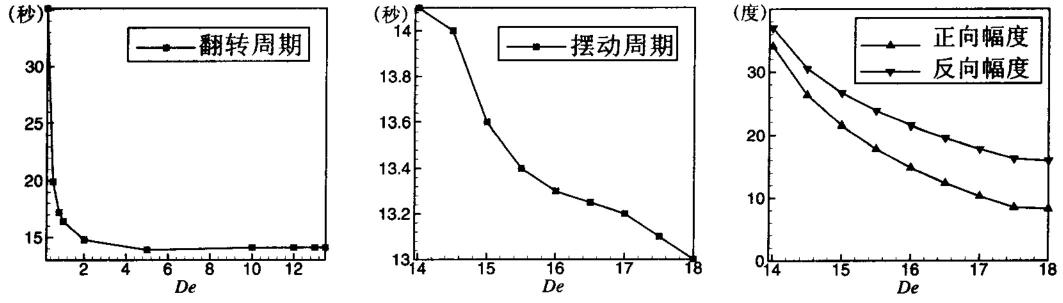


(a) $De = 20$ (b) $De = 50$

图 4: 随流取向结构的取向角演化图

5.2 De 数对周期运动的影响

5.1 节指出，液晶聚合物在均匀剪切流场中存在两种具有周期性的微观结构，即周期翻转结构与周期摆动结构。图5给出了 De 数对这两种结构的影响。从图5(a) 可以看出，在进入周期翻转运动之初，翻转周期随 De 数的增大，明显减小；随后，翻转周期达到下限，De数对其不再具有影响。从图 5(b) 可以看出，在整个周期摆动阶段，摆动周期随 De 数的增大而减小。与翻转阶段相比，摆动阶段周期的变化比较缓慢。图5(c) 给出了分子周期摆动时，摆动幅度随 De 数的变化。从图中可以看出，正向 (逆时针方向) 摆动幅度始终小于反向 (顺时针方向) 摆动幅度。两者均随 De 数的增大而减小，并且差距逐渐增大。

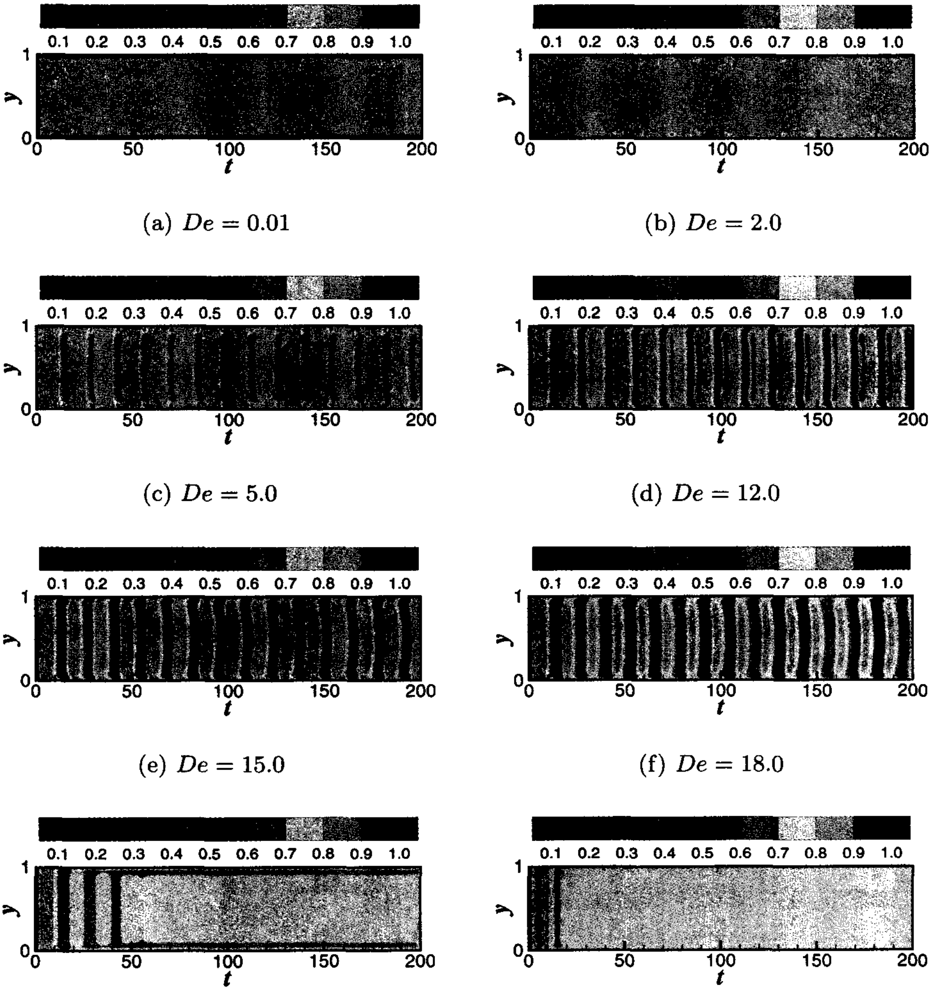


(a) 翻转周期 (b) 摆动周期 (c) 摆动幅度

图 5: De 数对周期运动的影响

5.3 有序程度及缺陷预测

研究分子取向的有序性并预测可能存在的缺陷，是液晶聚合物数值模拟的重要内容。图6给出了几组有序参量随时间的演化等值云图。图6(a)对应弹性稳态结构。从图6(a)中可以看出，有序参量取值保持在0.8以上，边界附近存在一些带状缺陷。图6(b)对应弹性稳态结构向周期翻转结构的过渡阶段。此时，有序参量在流场大部分区域保持在0.8以上，边界附近除了存在带状缺陷，还出现了明显的点状缺陷。图6(c)和图6(d)对应周期翻转结构。有序参量出现了较大幅度的周期性变化，取值周期性地浮动于0.5到1.0之间，边界附近的带状缺陷逐渐消失，点状缺陷依然比较显著。图6(e)和图6(f)对应周期摆动结构。有序参量变化的幅度较前有所增加，取值在0.1到0.9之间周期性变化，边界附近的点状缺陷程度较前有所减弱。图6(g)和图6(h)分别对应周期摆动向随流取向的过渡阶段和随流取向阶段。此时，有序参量不再周期性浮动，取值保持在0.7到0.8之间，点状缺陷消失，在液晶聚合物流体完全处于随流取向状态时，模拟结果无法预测任何缺陷。



(a) $De = 0.01$　　(b) $De = 2.0$

(c) $De = 5.0$　　(d) $De = 12.0$

(e) $De = 15.0$　　(f) $De = 18.0$

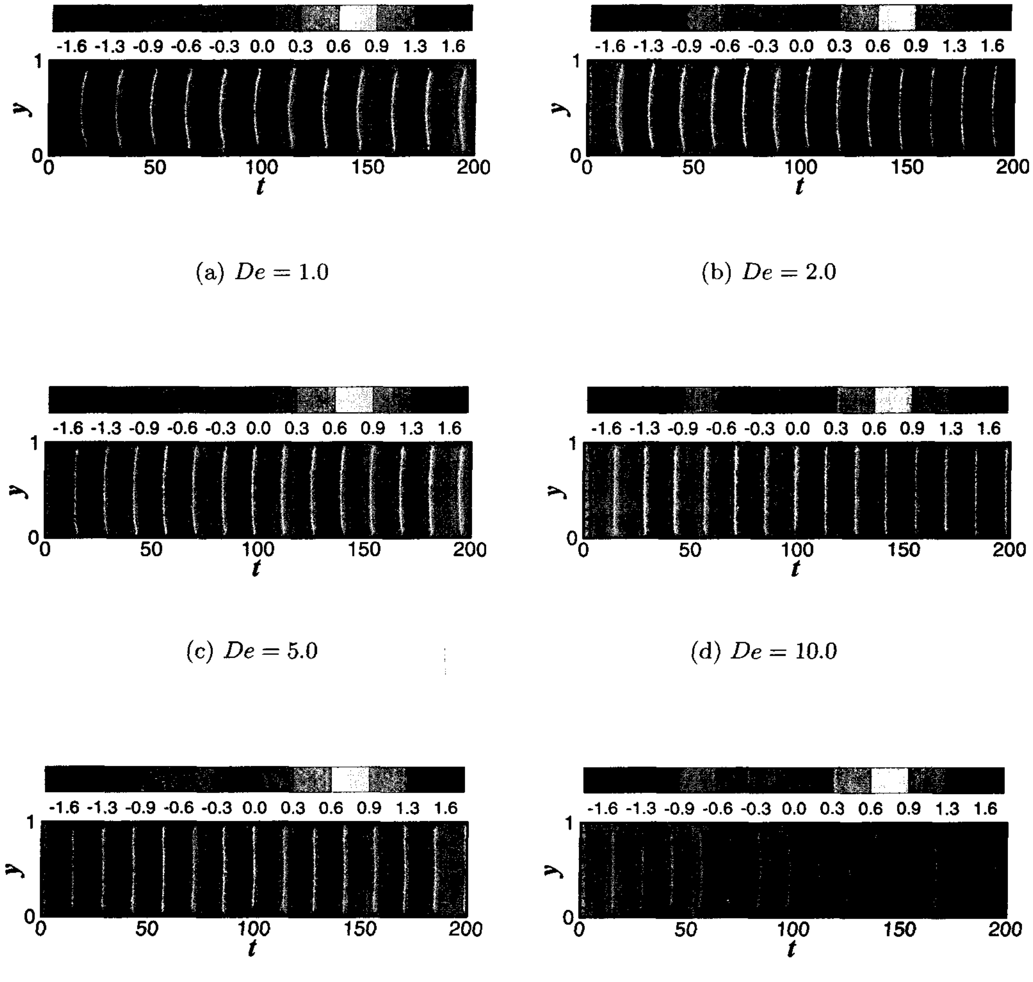
(g) $De = 30.0$　　(h) $De = 50.0$

图6: 有序参量随时间的演化等值云图

5.4 De 数与边界层效应的关系

由于边界会阻碍分子的转动，因而在周期翻转结构或周期摆动结构中可以观测到明显的边界效应。图7给出了几组取向角随时间的演化等值云图，其中等值线不同程度的弯曲说明了流场中存在边界层效应，并且这种效应与 De 数的大小有关。

为了清楚地观测这种边界层效应，并研究其随 De 数的变化规律，图8给出了一个周期内取向角随时间演化的局部放大等值云图。从图 8(a) ~ 图 8(c) 可以看到，发生周期运动时边界层附近分子较流场内部分子有一段时间的延迟，我们将其称作边界滞后效应。并且随着 De 数的增大，边界滞后效应具有明显的减弱趋势。当 De 数增大到一定程度之后，边界滞后效应消失，随之出现的是边界前驱效应 (见图 8(d) ~ 图 8(f))。出现边界前驱效应时，周期运动中边界层附近分子较流场内部分子提前发生转动。并且随着 De 数的增大，边界前驱效应显著增强。

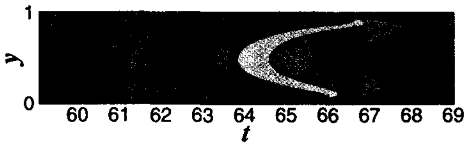


(a) $De = 1.0$ (b) $De = 2.0$

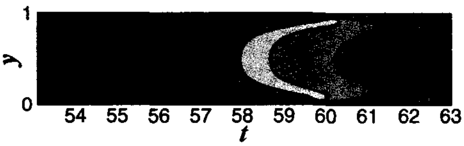
(c) $De = 5.0$ (d) $De = 10.0$

(e) $De = 12.0$ (f) $De = 15.0$

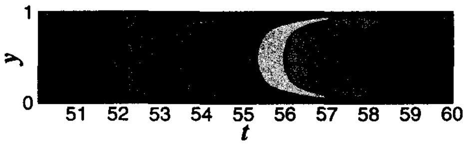
图 7: 取向角随时间的演化等值云图



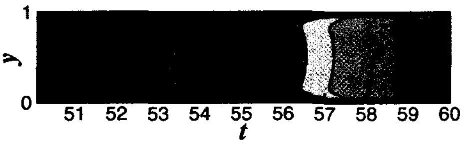
(a) $De = 1.0$



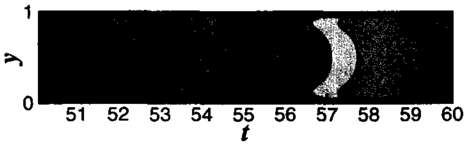
(b) $De = 2.0$



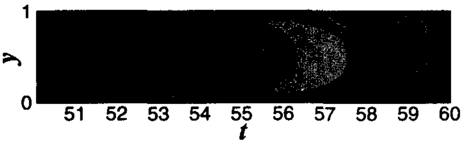
(c) $De = 5.0$



(d) $De = 10.0$



(e) $De = 12.0$



(f) $De = 15.0$

图 8:　取向角随时间演化局部放大等值云图

6　结论

首次运用EFG方法研究了均匀剪切流场中液晶聚合物的微观结构。该方法很好地保证了取向概率密度函数的计算精度及守恒性，从而确保了模拟结果的可靠性。模拟研究表明：

1)　随着 De 数的增大，液晶聚合物会依次呈现出四种典型的微观结构，即弹性稳态结构、周期翻转结构、周期摆动结构和随流取向结构。

2)　在周期翻转结构中，随着 De 数的增大，翻转周期起初迅速减小，后来趋于一稳定值；而在周期摆动结构中，随着 De 数的增大，摆动周期不断缓慢减小，并且摆动幅度不断衰减。

3)　四种结构中，分子都能保持较高的有序度。并且受分子周期运动的影响，有序度也会呈现周期性变化。

4)　除了随流取向结构外，在其他三种结构中不同程度地预测到了液晶缺陷。其中，在弹性稳态结构中会出现带状缺陷，周期翻转结构中会出现明显的点状缺陷和轻微的带状缺陷，周期摆动结构中只有轻微的点状缺陷。

5)　液晶聚合物处在周期翻转结构或周期摆动结构时，边界层附近可以观测到严重的边界层效应。De 数较小时，表现为边界滞后效应，并且效应随着 De 数的增大而减弱；De 数较大时，表现为边界前驱效应，并且效应随着 De 数的增大而增强。

参考文献:

[1] Onsager L. Theories and problems of liquid diffusion[J]. Annals of the New York Academy of Sciences, 1945, 46: 241-265

[2] Flory P J. Principles of Polymer Chemistry[M]. New York: Cornell University Press, 1953

[3] Saupe A. Recent results in the field of liquid crystals[J]. Angewandte Chemie International Edition, 1968, 7: 97-112

[4] Doi M, Edwards S F. The Theory of Polymer Dynamics[M]. Oxford: Oxford University Press, 1986

[5] Liu G R, Gu Y T. An Introduction to Meshfree Methods and Their Programming[M]. Netherlands: Springer, 2005

[6] Nguyen V P, *et al.* Meshless methods: a review and computer implementation aspects[J]. Mathematics and Computers in Simulation, 2008, 79: 763-813

[7] Belytschko T, Lu Y Y, Gu L. Element-free galerkin methods[J]. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 1994, 37: 229-256

[8] Helzel C, Otto F. Multiscale simulations for suspensions of rod-like molecules[J]. Journal of Computational Physics, 2006, 216: 52-75

[9] Yu H, Zhang P W. A kinetic-hydrodynamic simulation of microstructure of liquid crystal polymers in plane shear flow[J]. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2007, 114: 116-127

[10] Lozomski A. Spectral methods for kinetic theory models of viscoelastic fluids[D]. Lausanne: Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, 2003

Simulation of Microstructure for Liquid-crystalline Polymers in Homogenous Shear Flow by Meshfree Methods

WANG Xiao-dong, OUYANG Jie, SU Jin

(Department of Applied Mathematics, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710129)

Abstract: The micro-macro dual-scale model based on the Doi theory has been used to study the microstructure of liquid-crystalline polymers in homogenous shear flow. The element free Galerkin (EFG) method with high accuracy and good stability is used to solve the model. The validity of the EFG method has been verified through the simulation of homogenous liquid-crystalline polymers in uniform flow. Four typical microstructures of liquid-crystalline polymers in plane couette flow, say elastic-stability, periodic tumbling, periodic wagging and flow-aligning, have been found by observing the affect of the De number. Moreover, we analyze the influence of the De number on two periodic motions, predict the degree of molecular orders and implied defects, and find the two kinds of boundary effects.

Keywords: shear flow; liquid-crystalline; microstructure; dual-scale; meshfree

Received: 23 Nov 2009. **Accepted:** 17 Dec 2009.

Foundation item: The National Basic Research Program (973) of China (2005CB321704); the National Natural Science Foundation of China (10871159; 10590353).